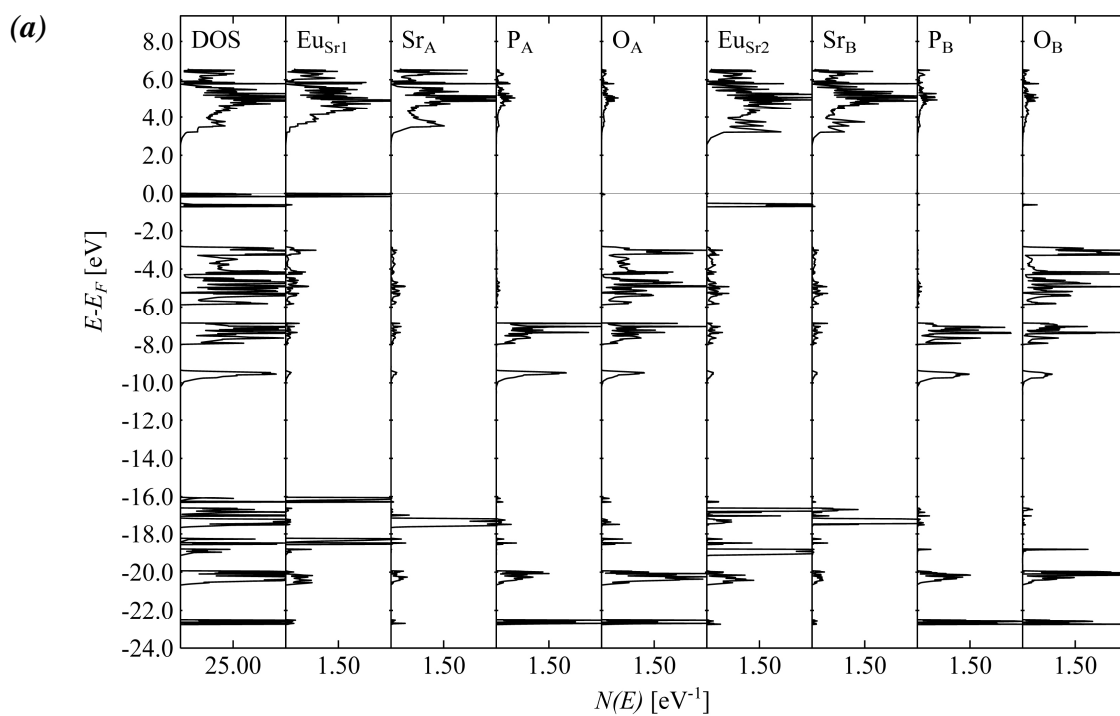
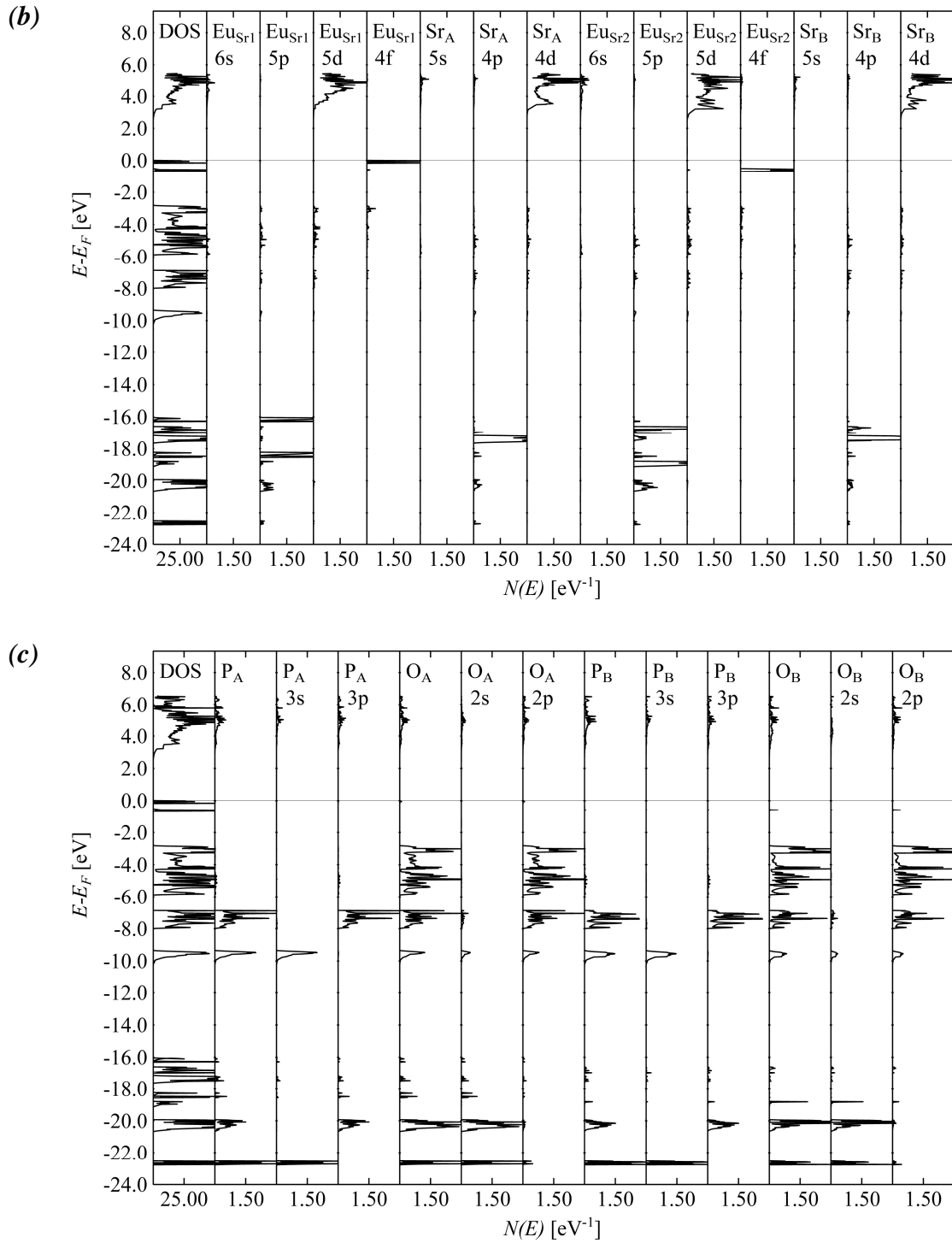


**Abb. B.21:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_2:\text{Eu}_{\text{Sr}2}$ , berechnet mit VASP GGA + U

(a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte

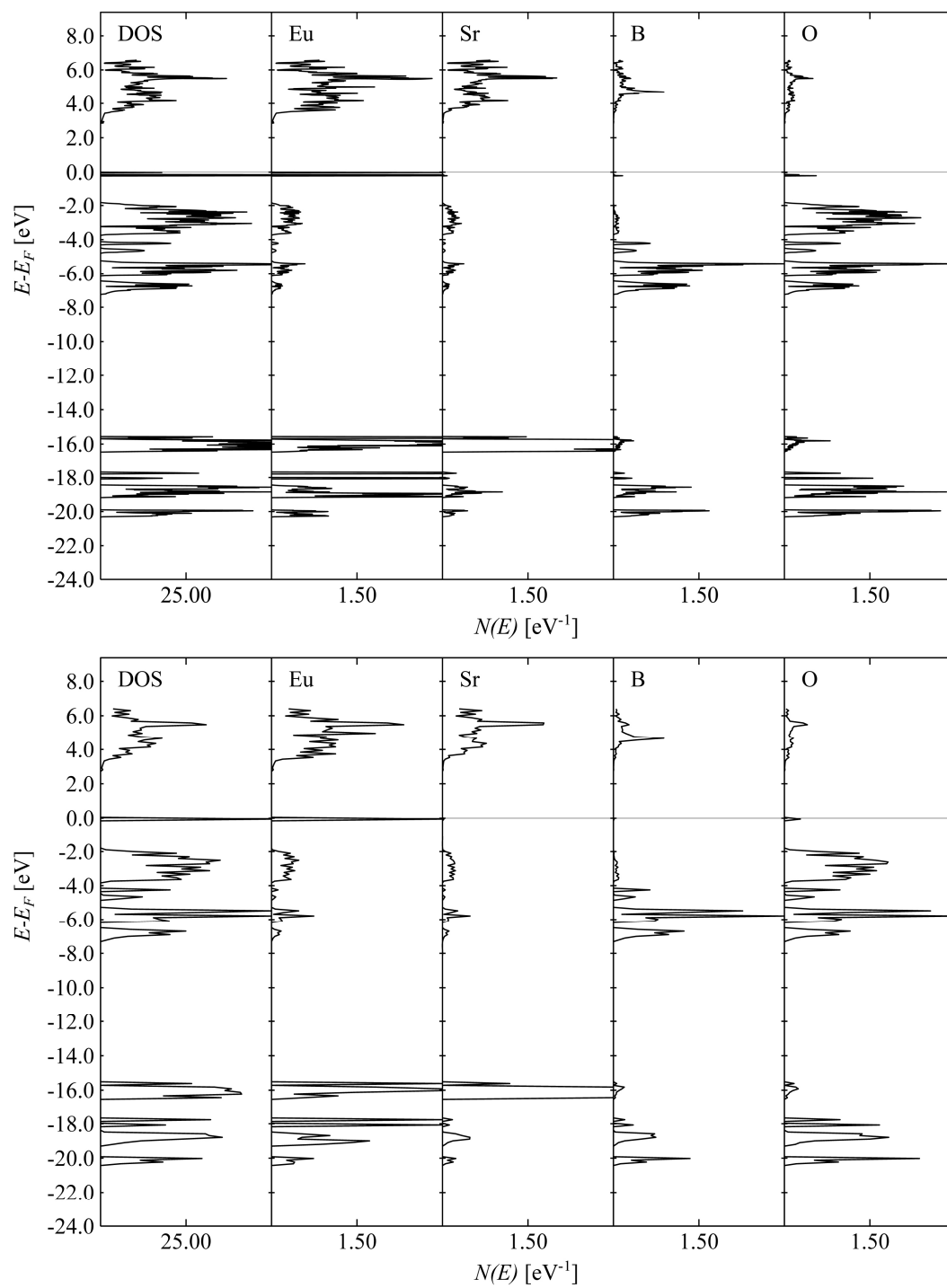
(b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte





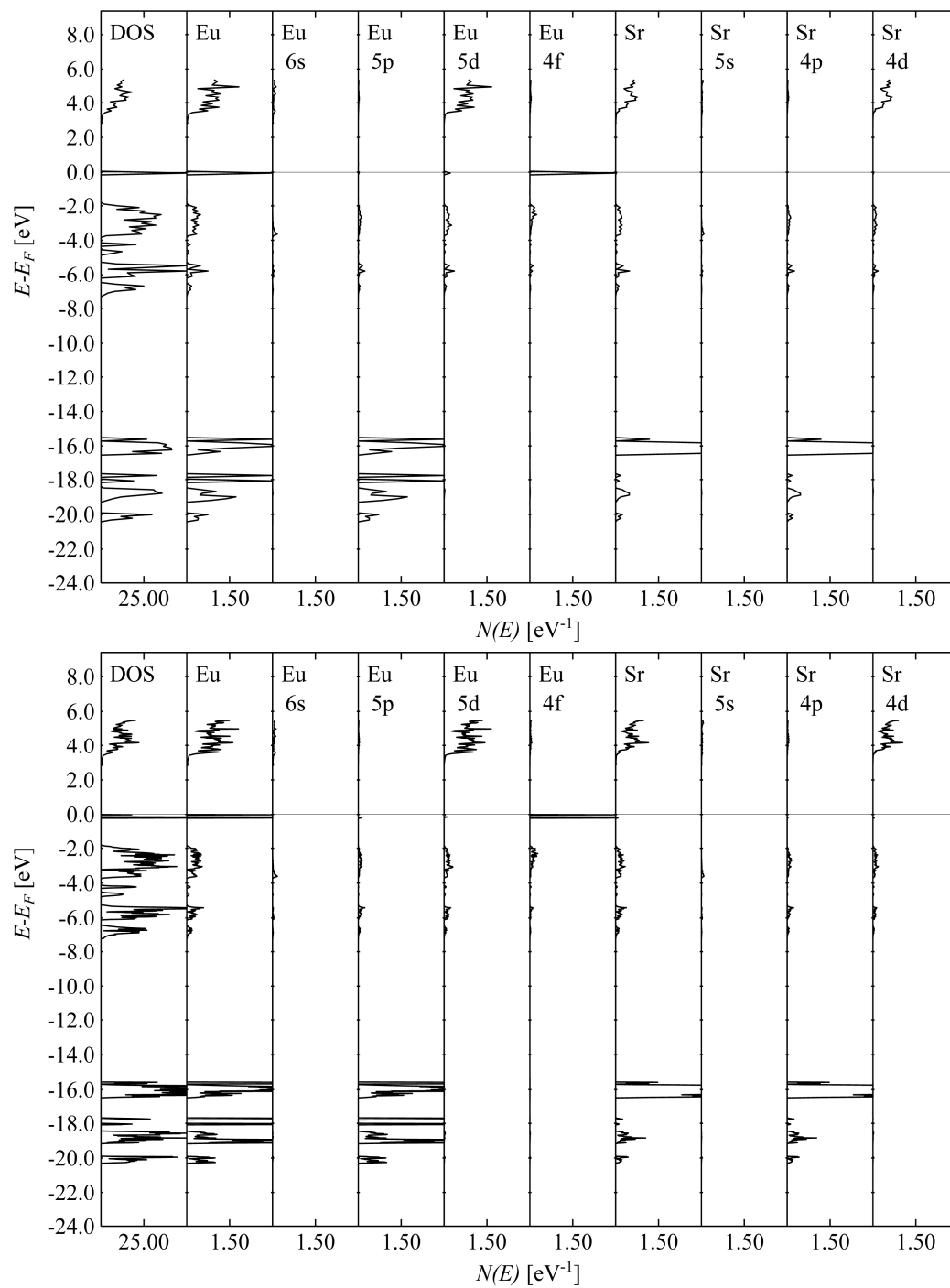
**Abb. B.22:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_2:\text{Eu}_{\text{Sr1},\text{Sr2}}$ , berechnet mit VASP GGA + U  
 (a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte  
 (b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte

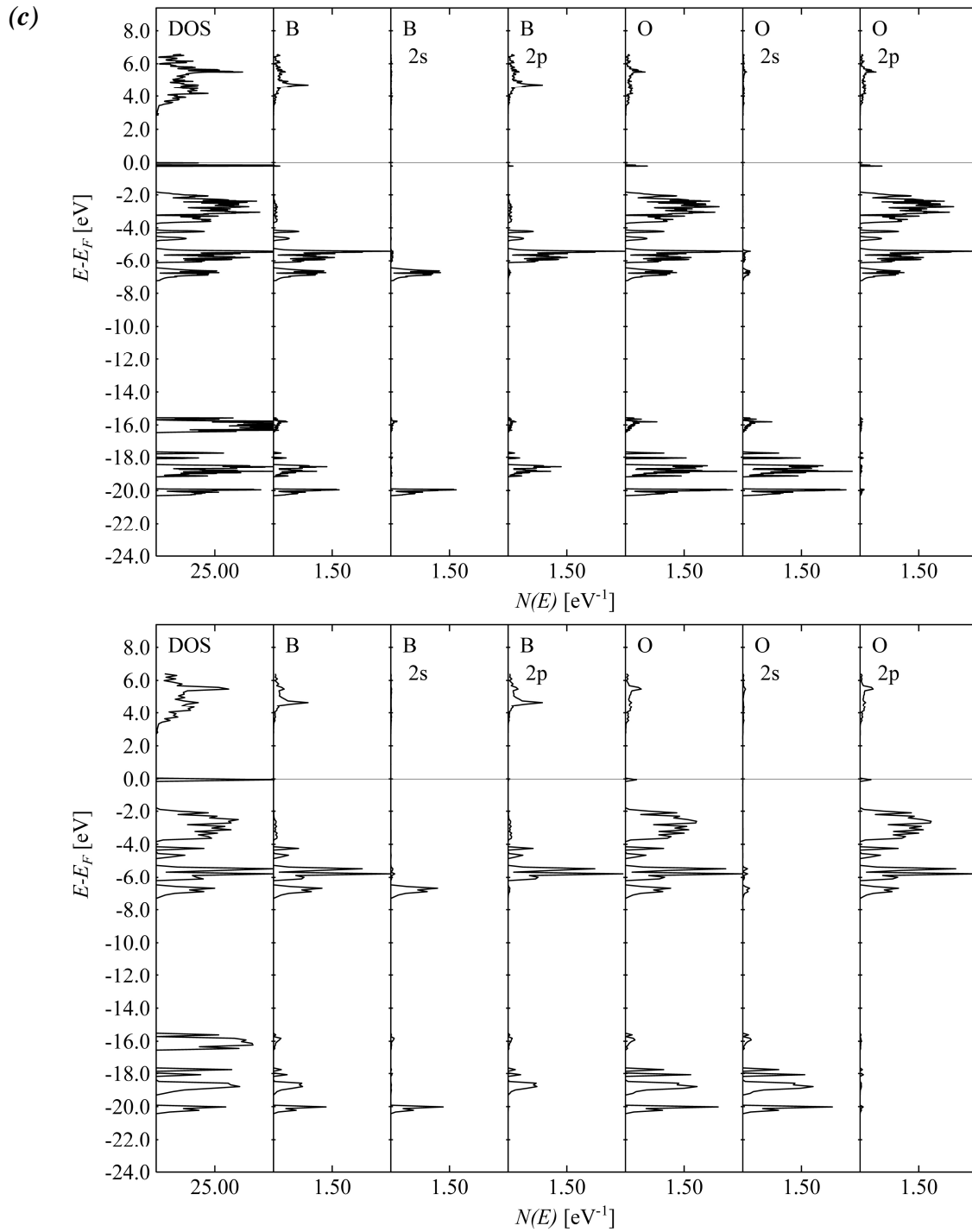
(a)



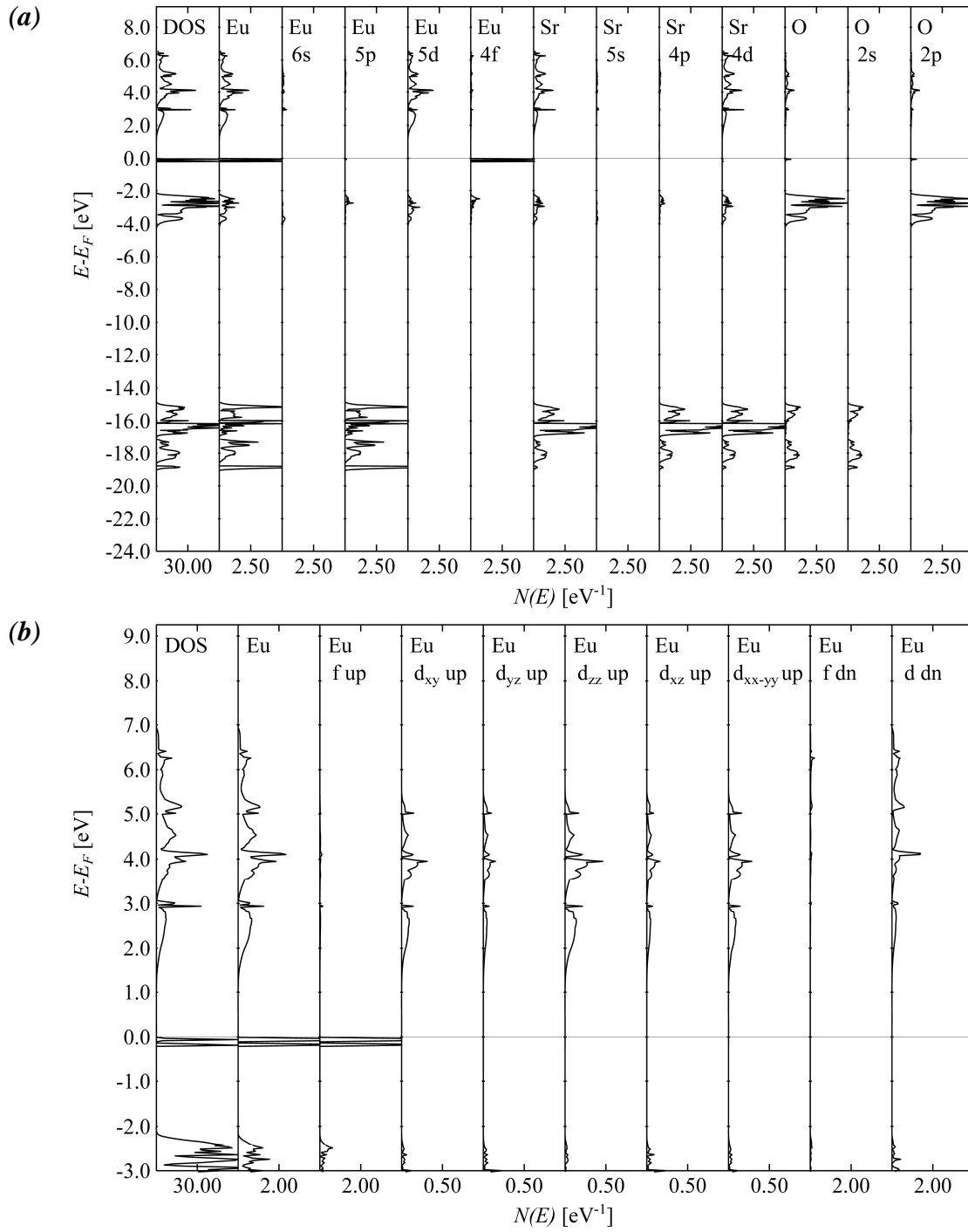


(b)

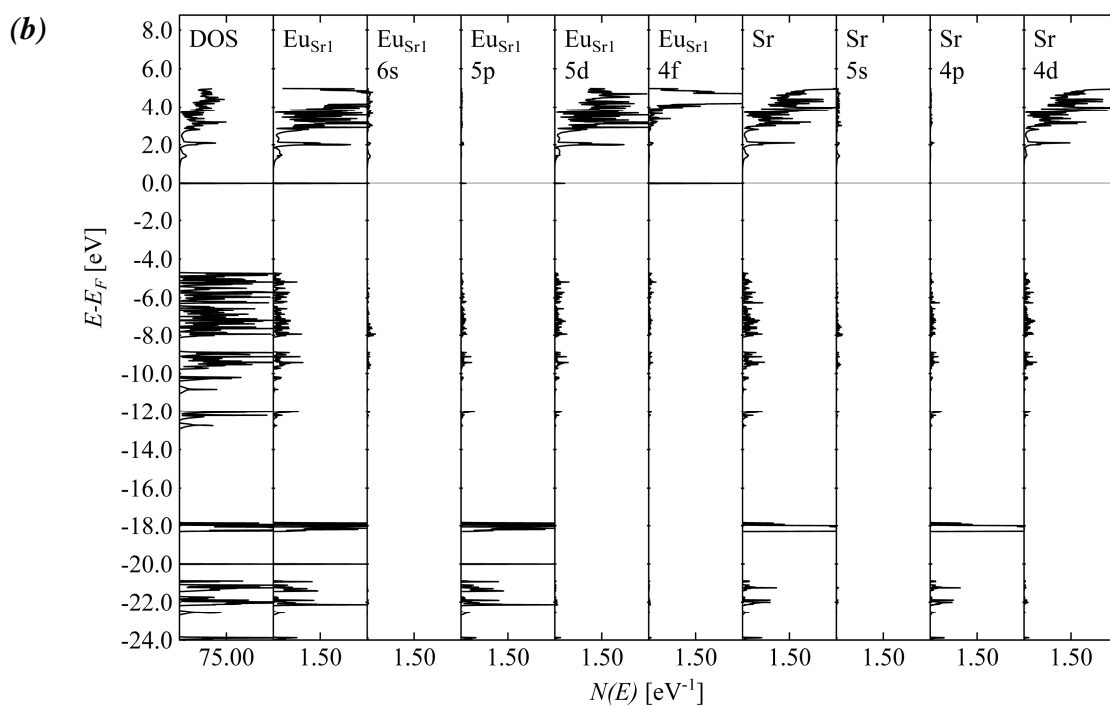
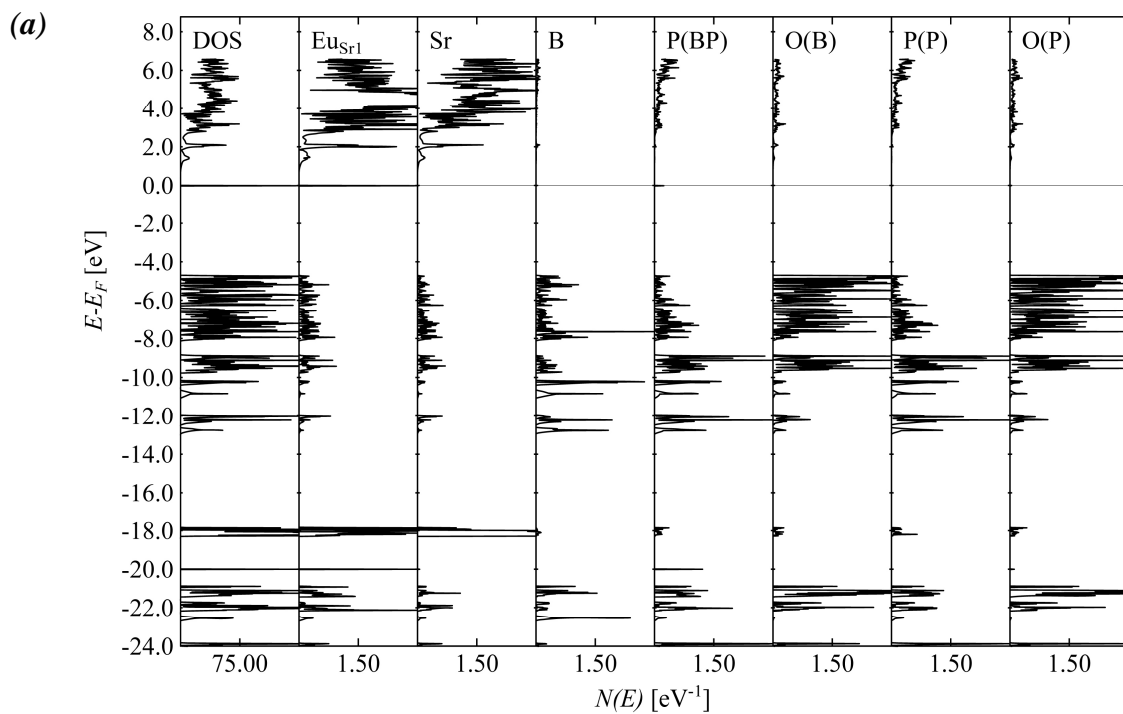


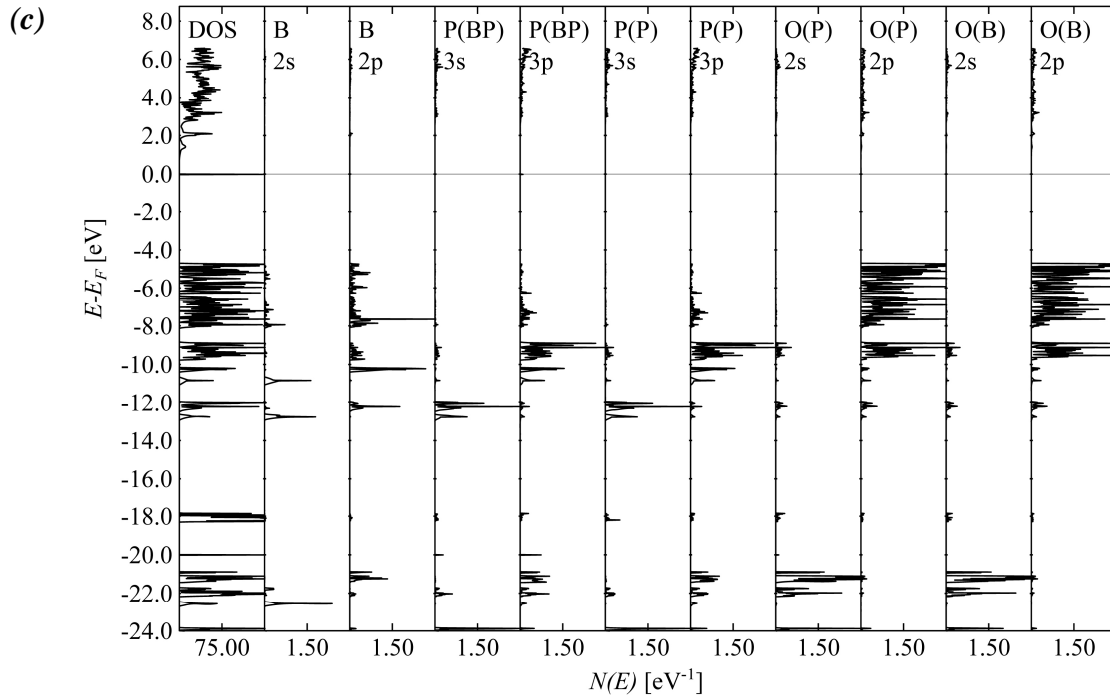


**Abb. B.23:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_3(\text{BO}_3)_2:\text{Eu}$ , berechnet mit VASP GGA + U  
 (a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte  
 (b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte

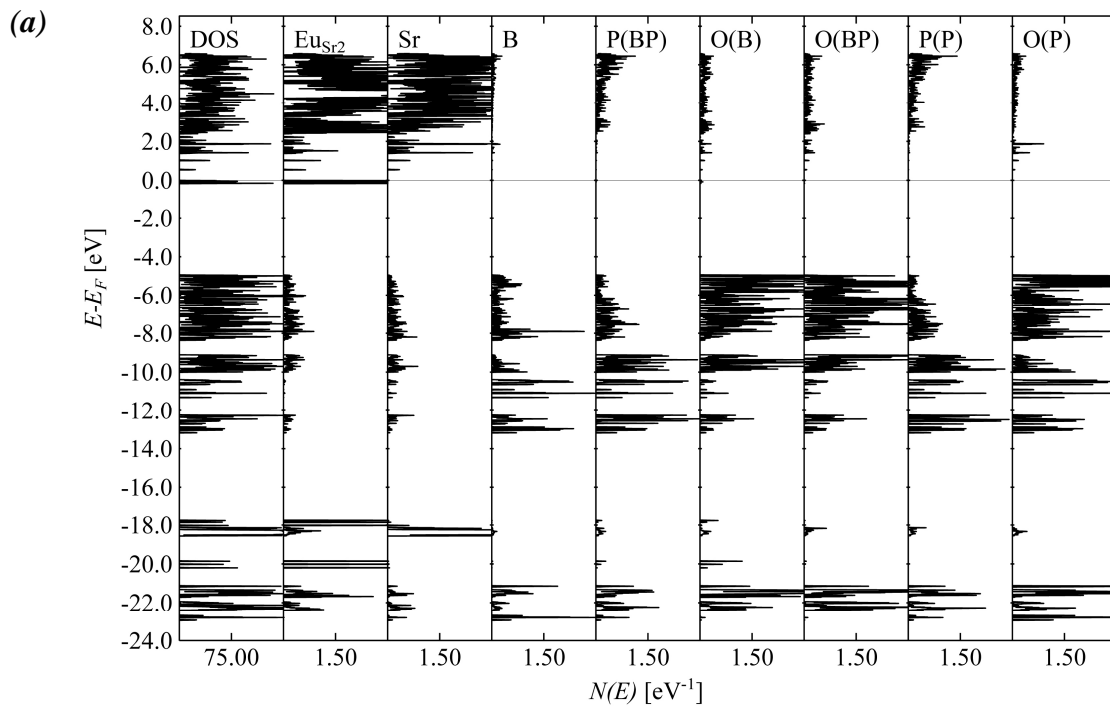


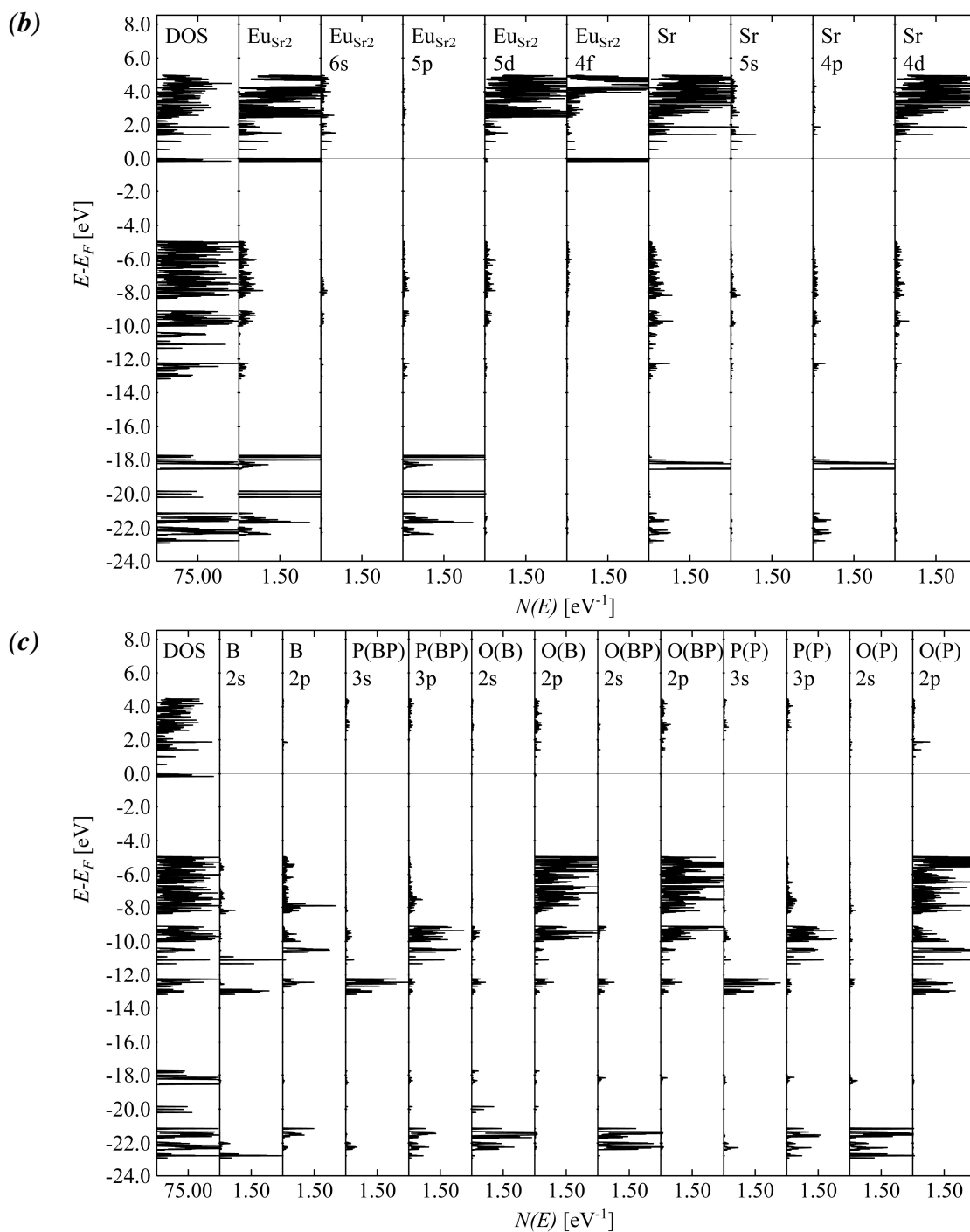
**Abb. B:24:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von SrO:Eu, berechnet mit VASP GGA + U  
 (a) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte



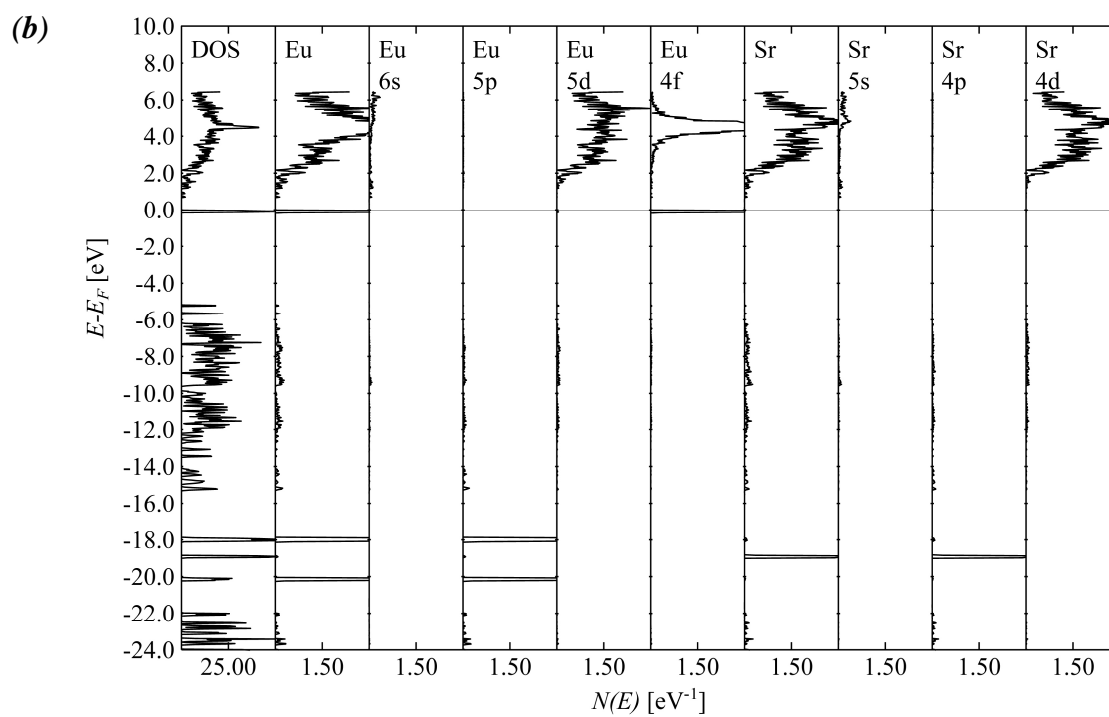
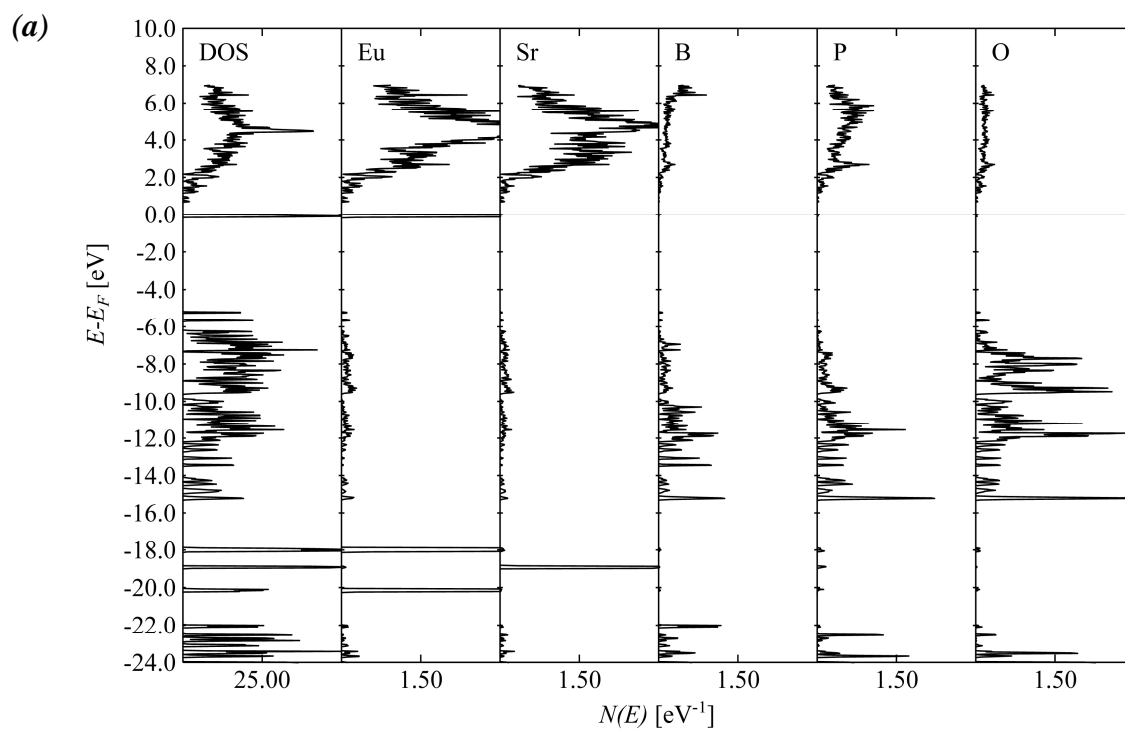


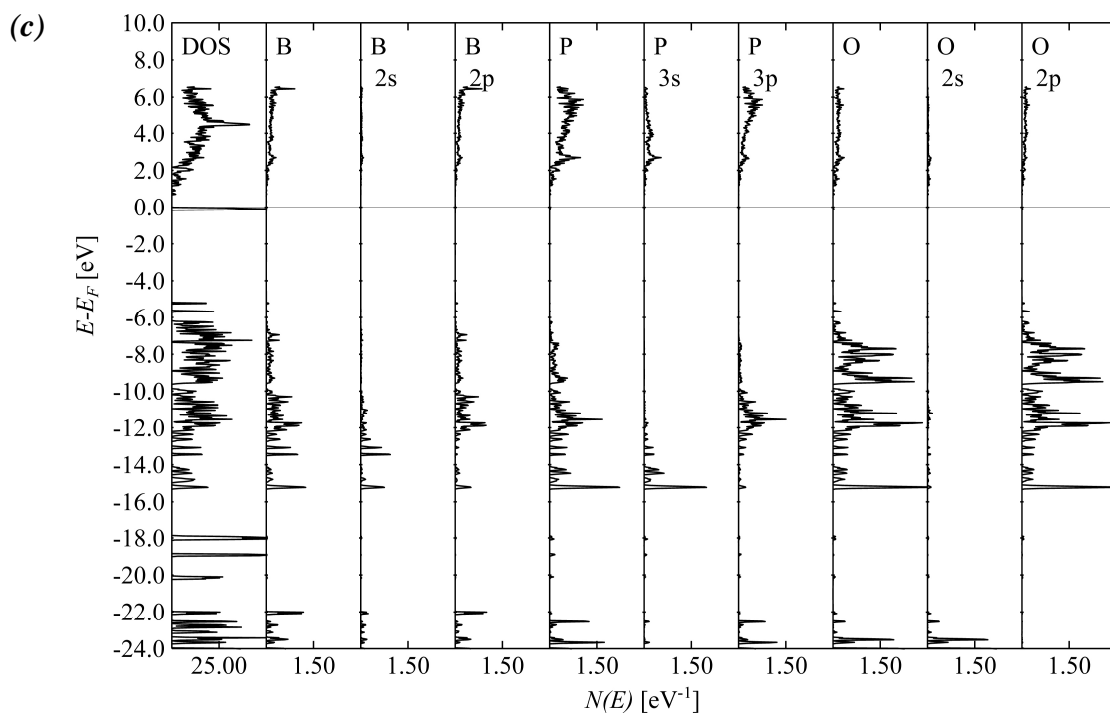
**Abb. B.25:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_6\text{B}(\text{PO}_4)_4 \text{PO}_4:\text{Eu}_{\text{Sr}1}$ , berechnet mit ASW GGA  
 (a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte  
 (b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte



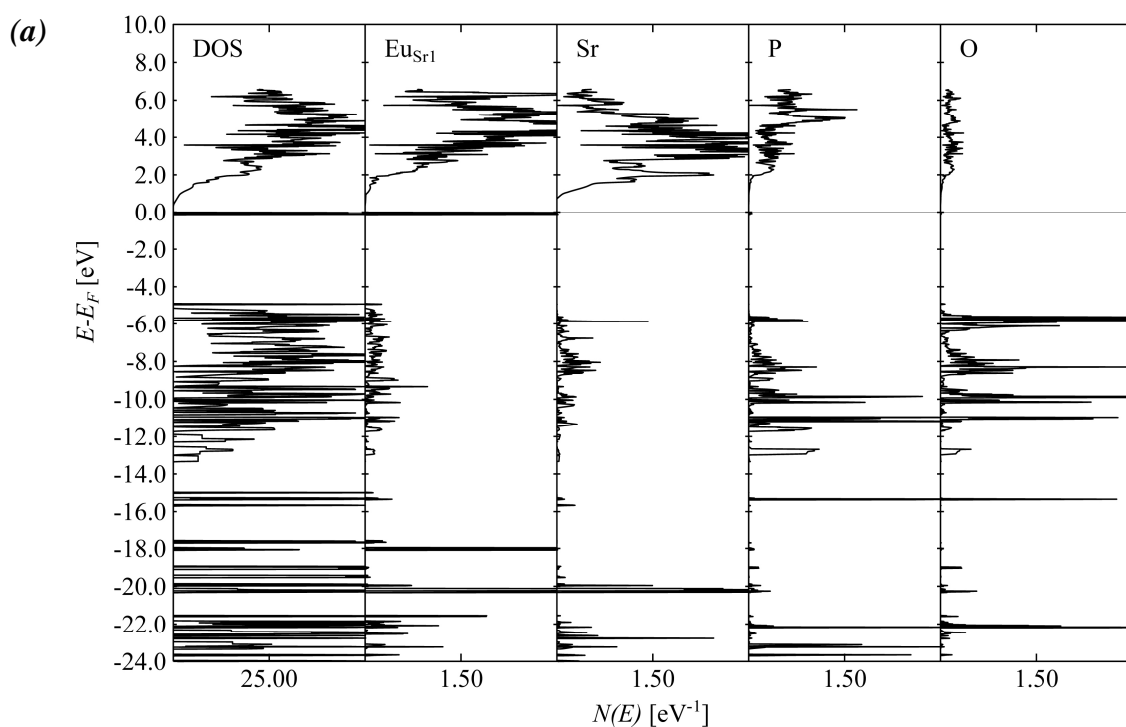


**Abb. B.26:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_6\text{B}(\text{PO}_4)_4\text{PO}_4:\text{Eu}_{\text{Sr}_2}$ , berechnet mit ASW GGA  
 (a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte  
 (b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte

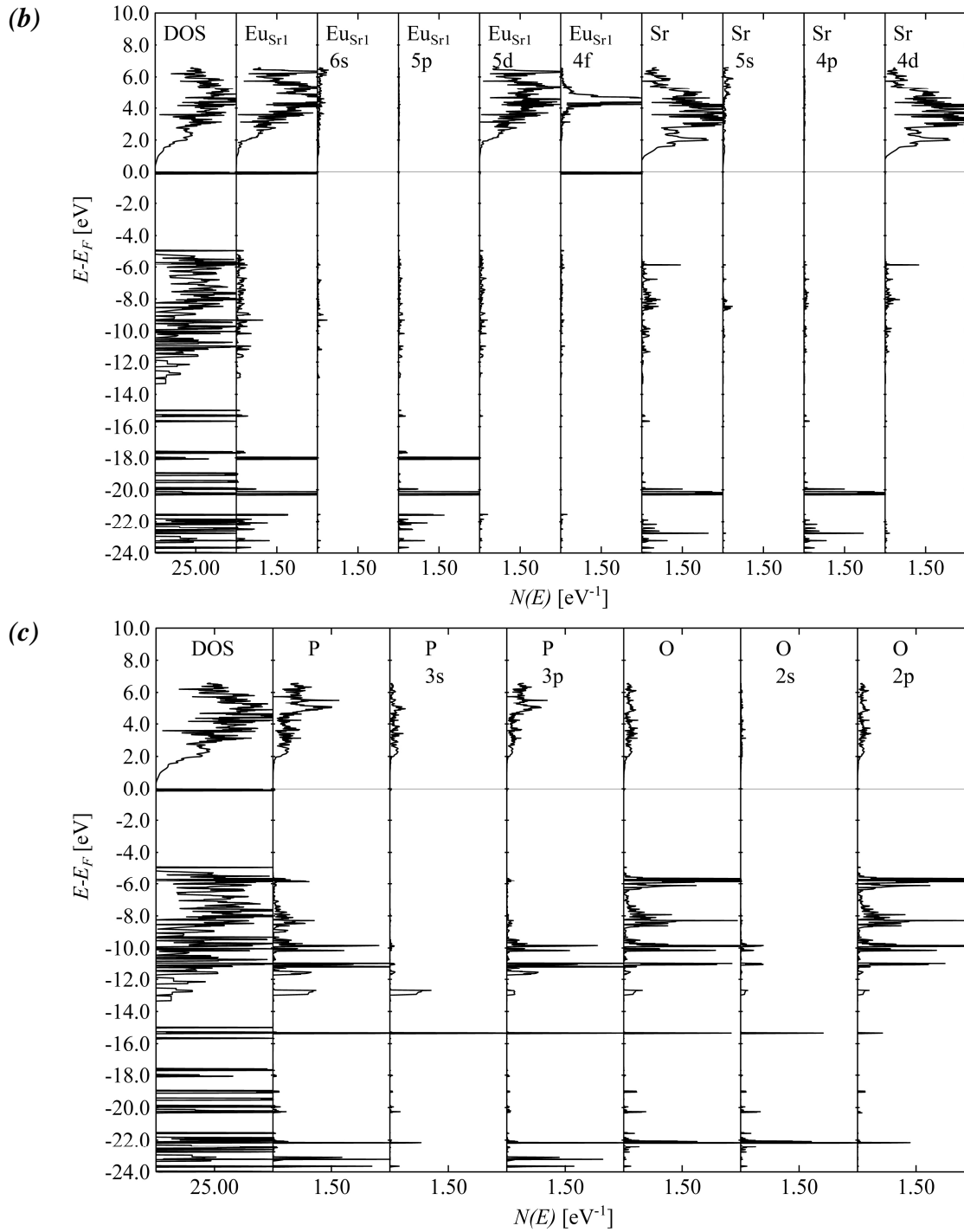




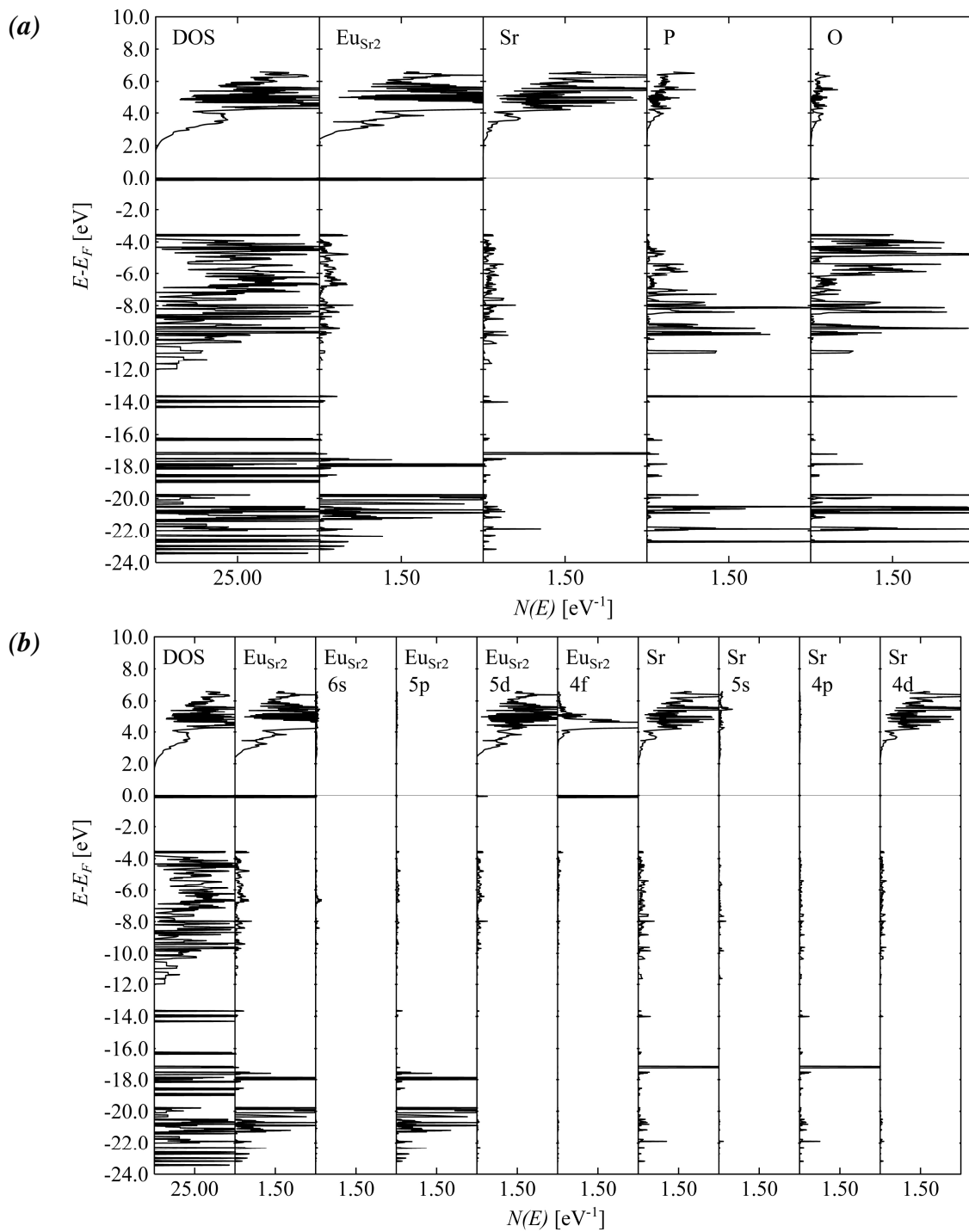
**Abb. B.27:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{SrBPO}_5:\text{Eu}$ , berechnet mit ASW GGA  
 (a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte  
 (b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte

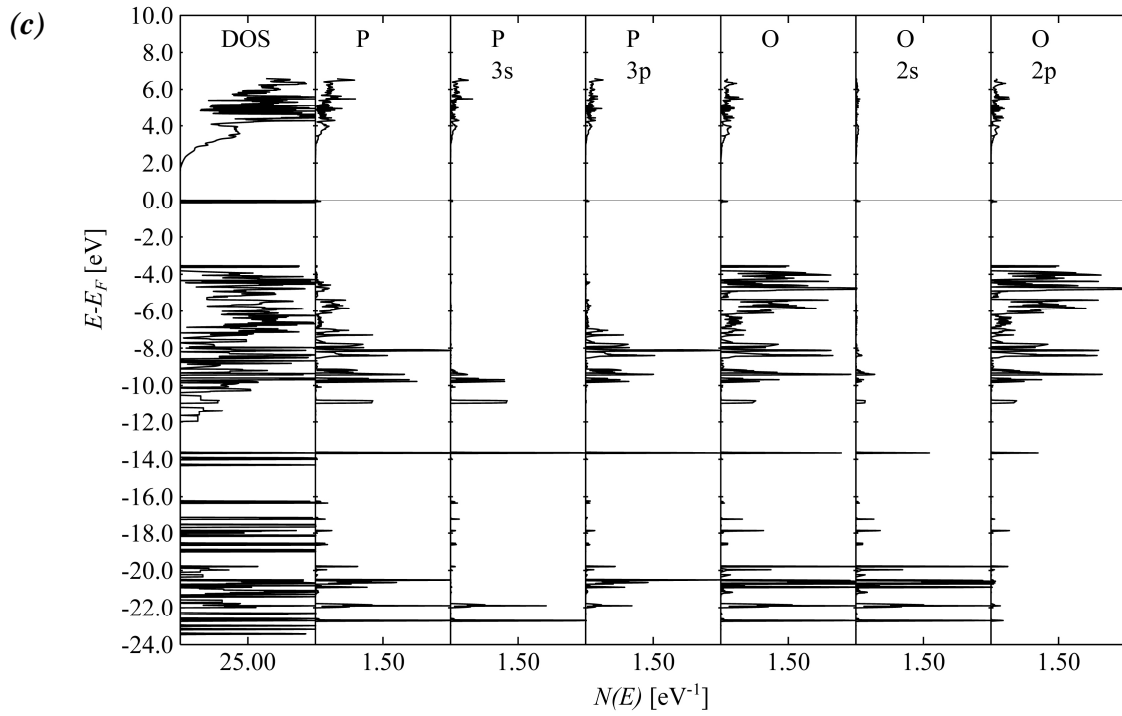






**Abb. B.28:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_2\text{P}_2\text{O}_7:\text{Eu}_{\text{Sr}1}$ , berechnet mit ASW GGA  
 (a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte  
 (b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte

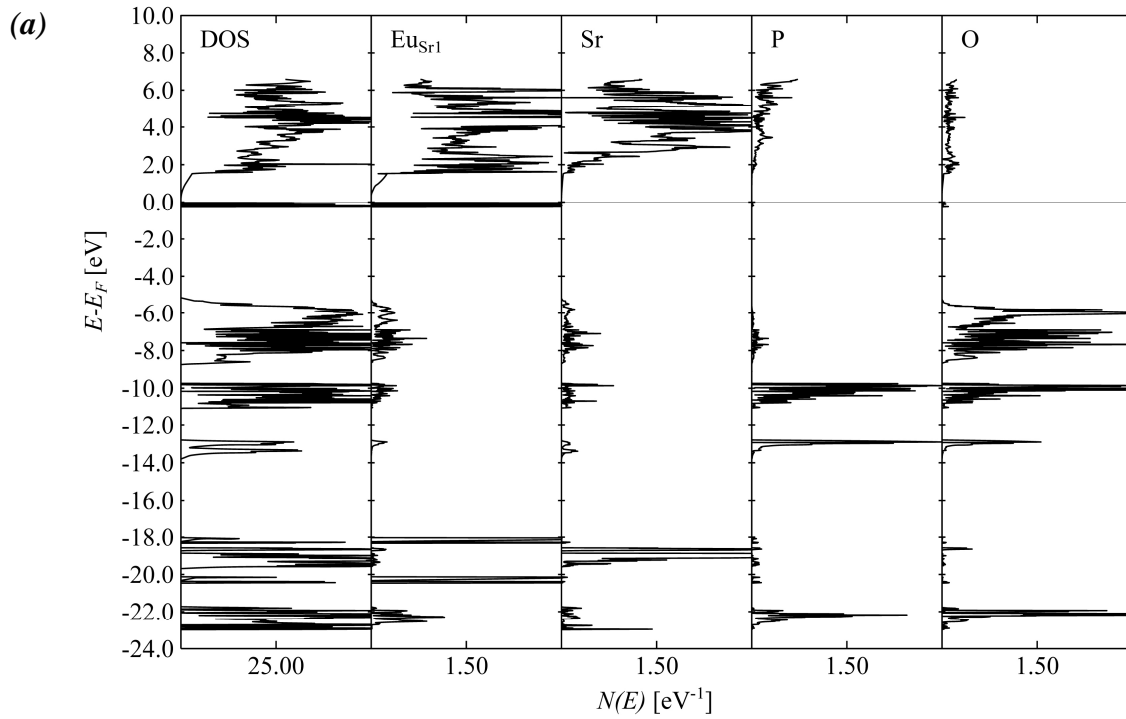


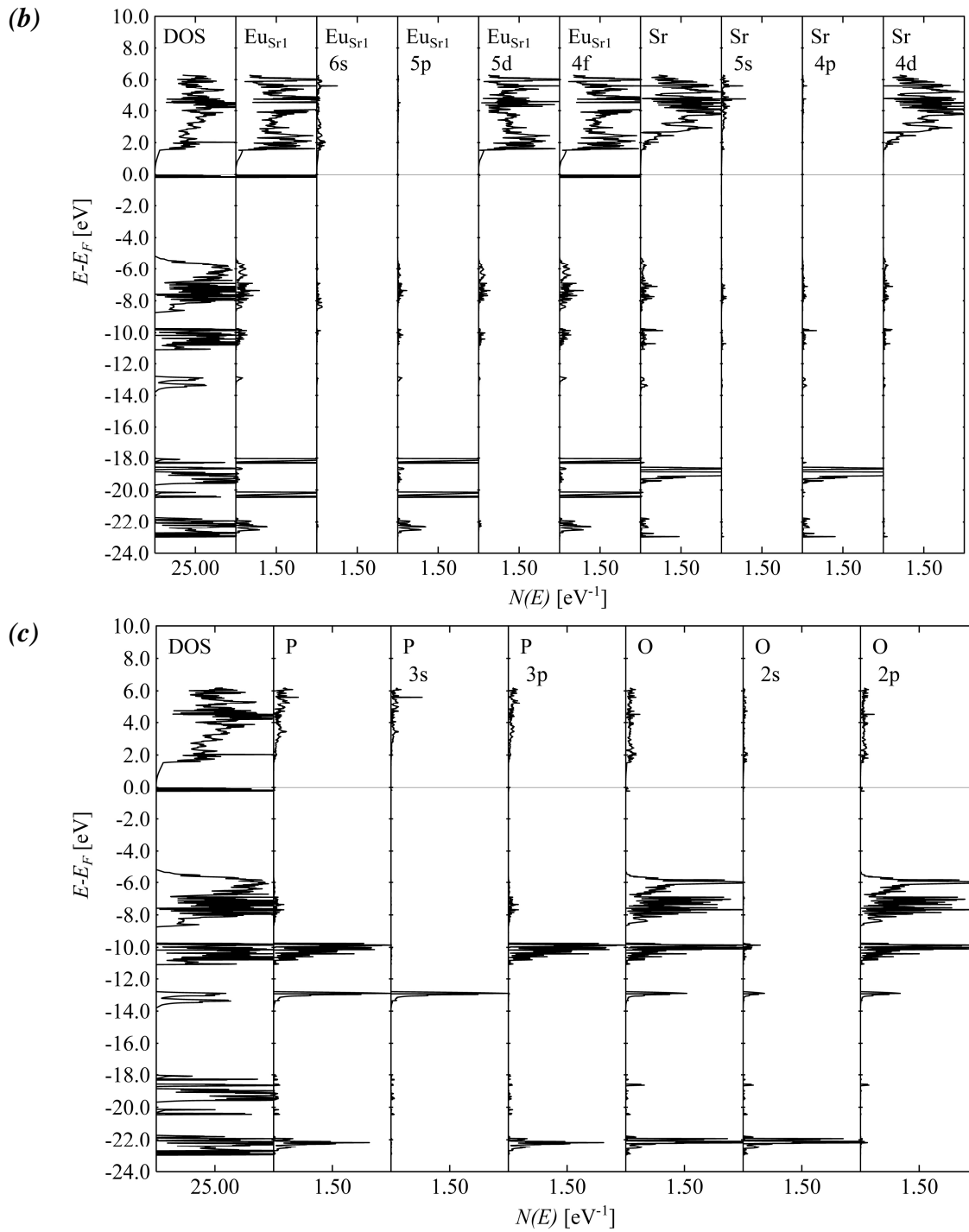


**Abb. B.29:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_2\text{P}_2\text{O}_7:\text{Eu}_{\text{Sr}2}$ , berechnet mit ASW GGA

(a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte

(b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpuls für jeweils ein Atom einer Atomsorte

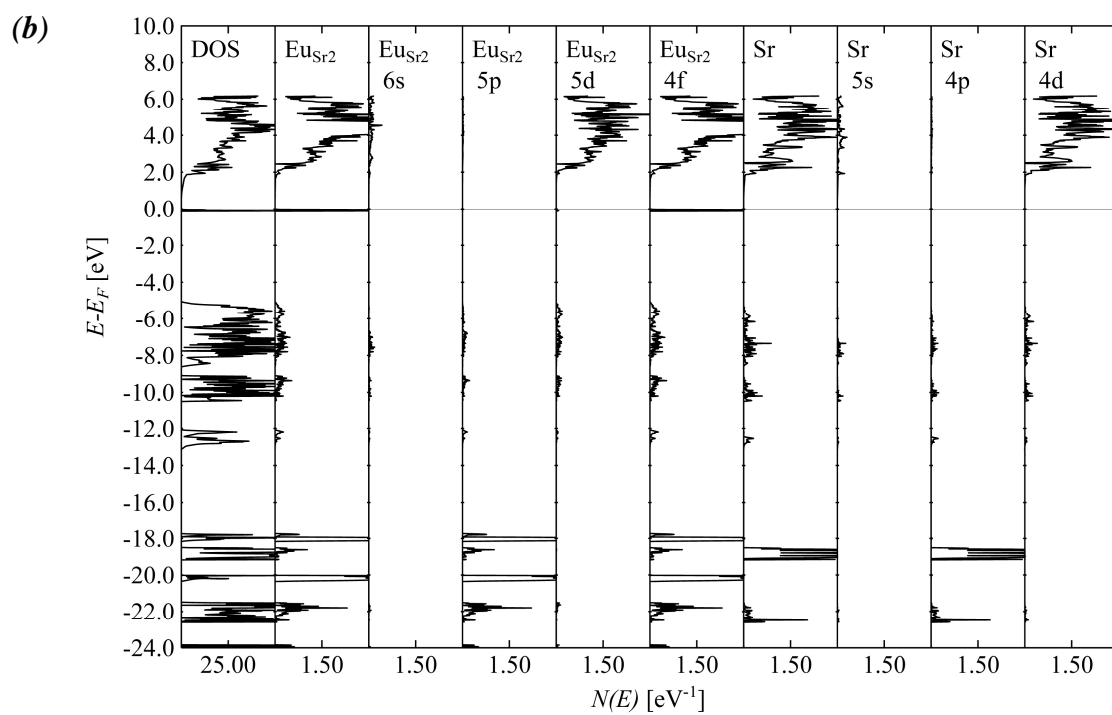
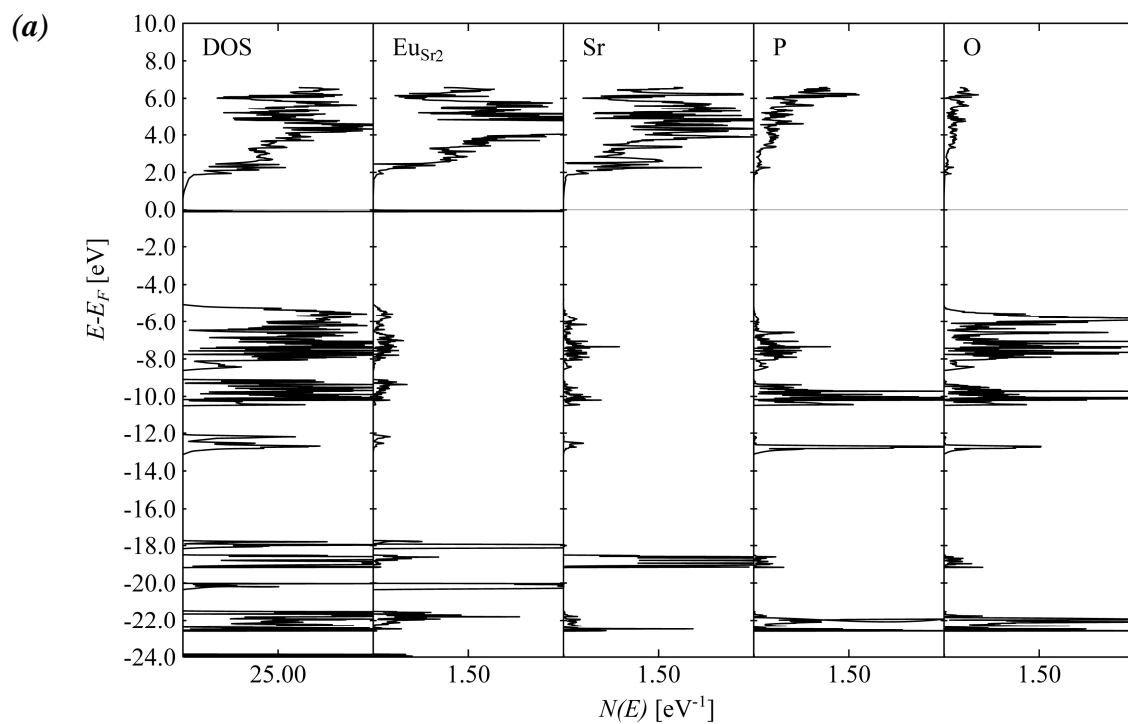


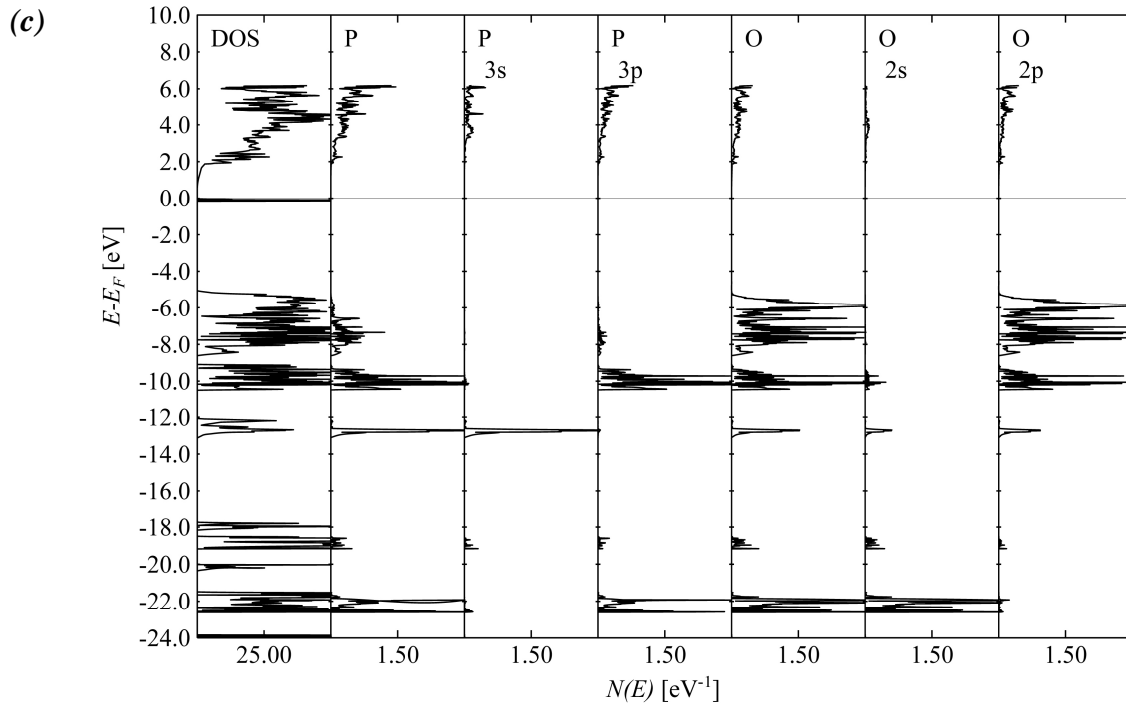


**Abb. B.30:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_2:\text{Eu}_{\text{Sr}1}$ , berechnet mit ASW GGA

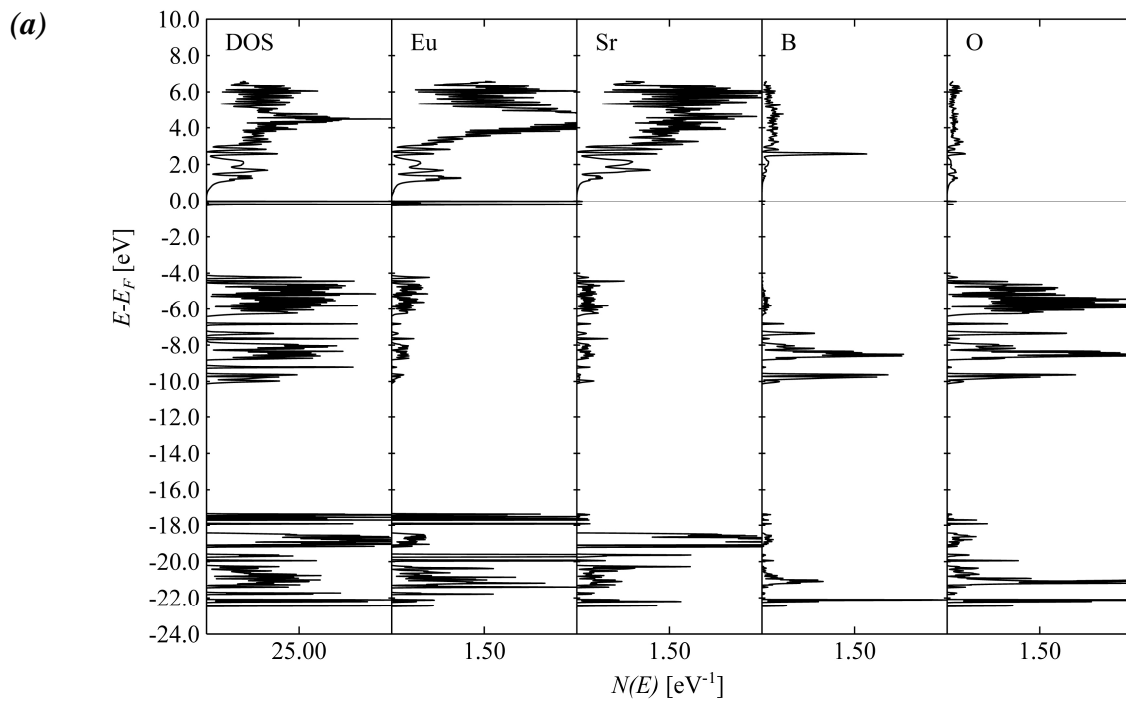
(a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte

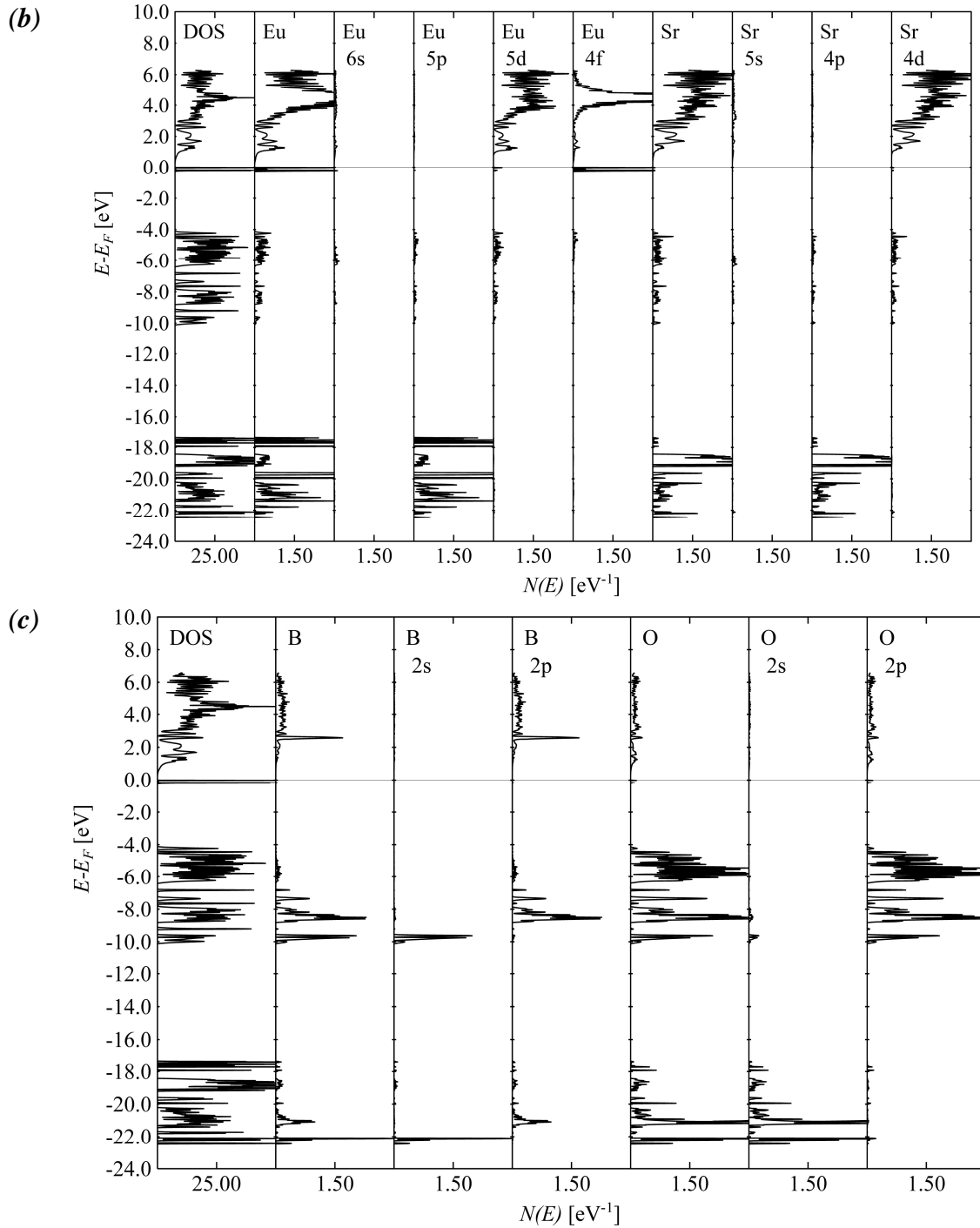
(b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte





**Abb. B.31:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_2:\text{Eu}_{\text{Sr}2}$ , berechnet mit ASW GGA  
 (a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte  
 (b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte

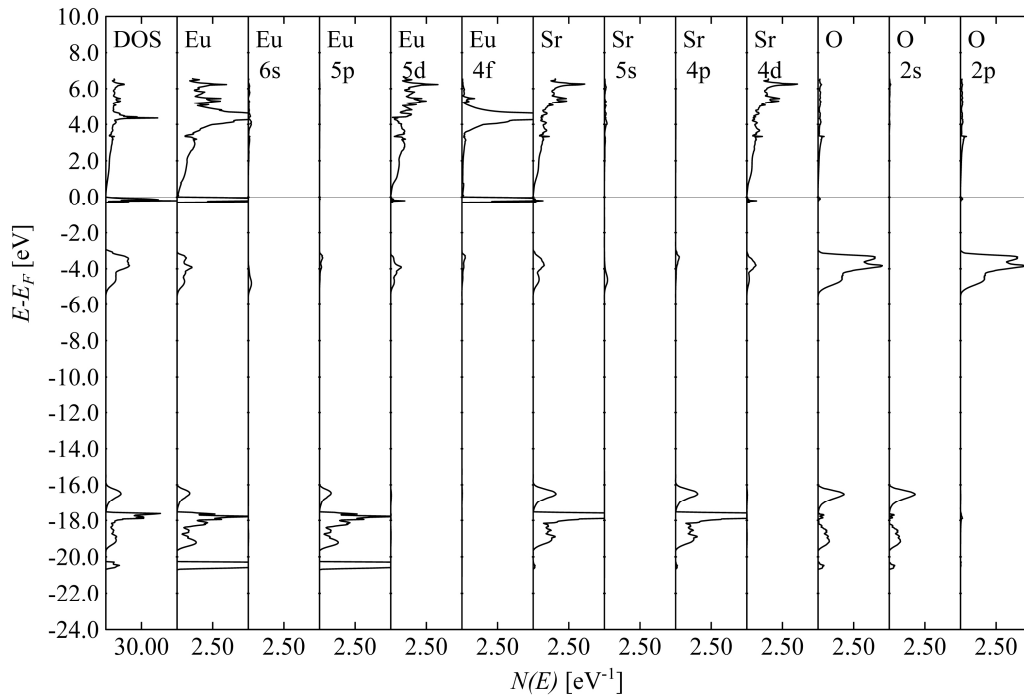




**Abb. B.32:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von  $\text{Sr}_3(\text{BO}_3)_2\text{:Eu}$ , berechnet mit ASW GGA

(a) für jeweils ein Atom einer Atomsorte

(b) und (c) aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpulsen für jeweils ein Atom einer Atomsorte



**Abb. B.33:** Zustandsdichte und partielle Zustandsdichten von SrO:Eu, berechnet mit ASW GGA, aufgeschlüsselt nach Bahndrehimpuls für jeweils ein Atom einer Atomsorte



## Anhang C. Kristallographische Daten

**Tab. C.1:** *Kristallographische Daten und Atomkoordinaten von  $\text{SrBPO}_5$  [Kni94]*

Kristallsystem			trigonal
Raumgruppe			P 3 <sub>1</sub> 2 1 (Nr. 152)
Gitterkonstanten / pm	<i>a</i>		684,9
	<i>c</i>		681,6
Summenformel			SrBPO <sub>5</sub>
Z			3

Atom	Lage	<i>x/a</i>	<i>y/b</i>	<i>z/c</i>
Sr1	3 <i>b</i>	0,394(1)	0,39400	1/2
B2	3 <i>b</i>	0,89200	0,89200	1/2
P1	3 <i>a</i>	0,402(3)	0,40200	0
O1	6 <i>c</i>	0,340(6)	0,197(7)	0,877(3)
O2	6 <i>c</i>	0,573(4)	0,436(3)	0,139(3)
O3	3 <i>a</i>	0,051(8)	0,051(8)	0

**Tab. C.2:** *Kristallographische Daten und Atomkoordinaten von  $\alpha\text{-Sr}_2\text{P}_2\text{O}_7$  [Bar98]*

Kristallsystem			orthorhombisch
Raumgruppe			P n a m (Nr. 62)
Gitterkonstanten / pm	<i>a</i>		894,6
	<i>b</i>		541,3
	<i>c</i>		1321,1
Summenformel			Sr <sub>2</sub> P <sub>2</sub> O <sub>7</sub>
Z			4

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c
Sr1	4 <i>c</i>	0,1737	0,2397	0,2500
Sr2	4 <i>c</i>	0,3762	0,4129	0,2500
P1	4 <i>c</i>	0,2250	0,0349	0,2500
P2	4 <i>c</i>	0,4690	0,1822	0,2500
O1	8 <i>d</i>	0,1499	0,0776	0,0210
O2	8 <i>d</i>	0,4167	0,2344	0,0080
O3	4 <i>c</i>	0,3978	0,0670	0,2500
O4	4 <i>c</i>	0,2307	0,0807	0,2500
O5	4 <i>c</i>	0,6342	0,1627	0,2500

**Tab. C.3:** *Kristallographische Daten und Atomkoordinaten von  $\text{Sr}_3\text{P}_2\text{O}_8$  [Zac48]*

Kristallsystem			trigonal
Raumgruppe			R -3 m (Nr. 166)
Gitterkonstanten / pm	<i>a</i>		539,0
	<i>c</i>		1978,5
Summenformel			Sr <sub>3</sub> P <sub>2</sub> O <sub>8</sub>
Z			3

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c
Sr1	3 <i>a</i>	0	0	0
Sr2	6 <i>c</i>	0	0	0,2065
P1	6 <i>c</i>	0	0	0,4065
O1	6 <i>c</i>	0	0	0,3296
O2	18 <i>h</i>	0,8447	0,1563	0,4329

**Tab. C.4:** *Kristallographische Daten und Atomkoordinaten von  $\text{Sr}_3\text{Eu}(\text{PO}_4)_3$  [Lau07]*

Kristallsystem					kubisch
Raumgruppe					$I -4 3 d$ (Nr. 220)
Gitterkonstanten / pm	$a$				1012,0
Summenformel					$\text{Sr}_3\text{Eu}(\text{PO}_4)_3$
Z					4

Atom	Lage	$x/a$	$y/b$	$z/c$	Besetzung
Sr	$16c$	0,0641	0,0641	0,0641	0,75
Eu	$16c$	0,0641	0,0641	0,0641	0,25
P	$12a$	3/8	0	1/4	1
O1	$48e$	0,0533	0,1300	0,3023	1/3
O2	$48e$	0,9700	0,1318	0,2831	1/3
O3	$48e$	0,0891	0,3353	0,4506	1/3

**Tab. C.5:** *Kristallographische Daten und Atomkoordinaten von  $\text{Sr}_3(\text{BO}_3)_2$  [Veg75]*

Kristallsystem	trigonal			
Raumgruppe	R -3 c (Nr. 167)			
Gitterkonstanten / pm	<i>a</i>	904,3		
	<i>c</i>	1256,6		
Summenformel	Sr <sub>3</sub> B <sub>2</sub> O <sub>6</sub>			
Z	6			

Atom	Lage	x/a	y/b	z/c
Sr	18e	0,3551	0	1/4
B	12c	0	0	0,1146
O	36f	0,1588	0,0107	0,1148

**Tab. C.6:** *Kristallographische Daten und Atomkoordinaten von  $\text{SrO}$  [Pri48]*

Kristallsystem	kubisch			
Raumgruppe	F m -3 m (Nr. 225)			
Gitterkonstanten / pm	<i>a</i>	514,0		
Summenformel	SrO			
Z	4			
Atom	Lage	x/ <i>a</i>	y/ <i>b</i>	z/ <i>c</i>
Sr	1 <i>a</i>	0,0000	0,0000	0,0000
O	1 <i>a</i>	0,5000	0,5000	0,5000

## D. ASA-Radien der ASW-Rechnungen

**Tab. D.1:** ASA-Radien der ASW-Rechnung  
für  $\text{Sr}_6\text{B}(\text{PO}_4)_4\text{PO}_4\text{:Eu}$

Atom	$R_{\text{ASA}} / a_0$
Eu	3,119752
Sr	3,119752
B	1,671850
P	1,848707
O7-O24	1,624695

**Tab. D.2:** ASA-Radien der ASW-Rechnung  
für  $\text{SrBPO}_5\text{:Eu}$

Atom	$R_{\text{ASA}} / a_0$
Eu	3,107001
Sr	3,107001
B	1,789139
P	1,714208
O	1,821346

**Tab. D.3:** ASA-Radien der ASW-Rechnung  
für  $\text{Sr}_2\text{P}_2\text{O}_5\text{:Eu}$

Atom	$R_{\text{ASA}} / a_0$
Eu	3,424679
Sr1,Sr2	3,390429
Sr3	3,390429
Sr4-Sr7	3,198069
P1-P4	1,917669
P5-P8	1,929469
O1-O4	1,716930
O5-O12	1,644130
O13-O20	1,649080
O21-O24	1,632980
O25-O28	1,626880

**Tab. D.4:** ASA-Radien der ASW-Rechnung  
für  $\text{Sr}_3(\text{PO}_4)_2\text{:Eu}$

Atom	$R_{\text{ASA}} / a_0$
Eu	3,099249
Sr1	3,296499
Sr2, Sr3	3,263449
Sr4	3,068230
Sr5, Sr6	3,068370
Sr7	3,068260
Sr8	3,099219
P1, P2	1,861650
P3, P4	1,861660
P5, P6	1,861680
O1, O2	1,573260
O3, O4	1,573270
O5, O6	1,573280
O7-O24	1,594240

**Tab. D.5:** ASA-Radien der ASW-Rechnung  
für  $\text{Sr}_3(\text{BO}_3)_2$

Atom	$R_{\text{ASA}} / a_0$
Eu	2,321200
Sr	2,321200
B	1,235830
O	1,297630

**Tab. D.6:** ASA-Radien der ASW-Rechnung  
für  $\text{SrO:Eu}$

Atom	$R_{\text{ASA}} / a_0$
Eu	2,751280
Sr	2,751280
O	2,092500



## **E. Hilfsmittel**

Der vorliegende Text wurde mit dem Textverarbeitungsprogramm Word [WOR03] in neuer deutscher Rechtschreibung [DUD00] erstellt. Die Auftragungen wurden mit ORIGIN 6.0 [ORI6], Strukturabbildungen mit dem Programm DIAMOND 2.0[DIA22] und Auszüge aus elektronischen Schriftstücken mit Acrobat Professional [ACR04] erzeugt. Zur Bearbeitung von Abbildungen wurde das Programm Photoshop CS2 [PHO05] verwendet.



## Lebenslauf

Name	Sonja Laubach, geb. Schulenburg
geboren am	24.06.1976
in	Darmstadt
Familienstand	verheiratet

## Schul Ausbildung

1982-1986	Georg-August-Zinn-Schule Darmstadt
1986-1988	Förderstufe der Thomas-Mann-Schule Darmstadt
1988-1995	Justus-Liebig-Schule (Gymnasium) Darmstadt
Juni 1995	Abitur

## Studium

1995-1997	Biologiestudium an der Technischen Hochschule Darmstadt (Abschluss: Diplomverprüfung Teilbereich Mikrobiologie)
1996-2003	Chemiestudium an der Technischen Hochschule/Universität Darmstadt
Sept. 1999 -Mai 2000	Auslandsaufenthalt an der University of Bristol (England), Final Year Research Project (dortige Studien-Abschlussarbeit): „Ion-Imaging Studies of the Photodissociation of IBr“
Feb. 2003	Diplomhauptprüfung Diplomarbeit: Sauerstoffleerstellen in Zinkoxid – eine quantenmechanische Studie
Sept. 2003	Beginn der Promotion und Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Eduard-Zintl-Institut für Anorganische und Physikalische Chemie der Technischen Universität Darmstadt unter der Leitung von Prof. P.C. Schmidt
Mai 2007- Okt. 2007	Unterbrechung der Promotion wegen Mutterschutz und Elternzeit durch die Geburt eines Kindes am 06.07.2007

## Qualifikationen

2003-2006	Mitwirkung am SFB 595 durch theoretische Arbeiten zum Thema Ferroelektrika
seit 2007	Wissenschaftliche Mitarbeiterin im SFB 595 am Institut für Materialwissenschaften der Technischen Universität Darmstadt





Sonja Laubach

13. Mai 2008  
Händelstr. 42  
64291 Darmstadt

### Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich an Eides Statt, dass ich die vorliegende Dissertation selbständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.



Sonja Laubach

13. Mai 2008  
Händelstr. 42  
64291 Darmstadt

## Erklärung

Ich erkläre hiermit, noch keinen Promotionsversuch unternommen zu haben.